

水素分子の 解離性再結合断面積

北里大一般教育 高木秀一

注：詳細は原子力機構の委託調査報告書を参照のこと

2009.3.17

日本原子力研究開発機構「原子分子データ活用に関する研究会」

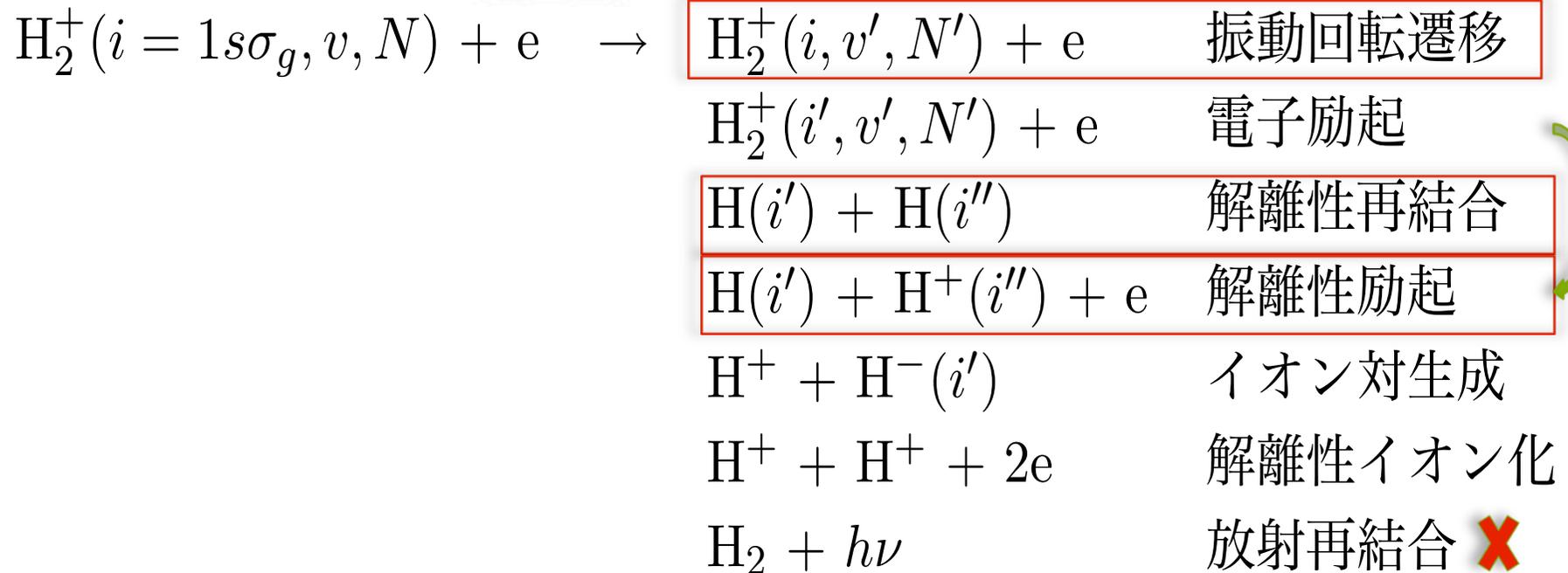
Detached plasma

◆ ガスダイバータ detached plasma

Molecular Assisted Recombination,
Dissociation,
Ionization.

effect of high rotational states,
excited atom production

水素分子イオンの関与する過程



電子状態 (Sharp)

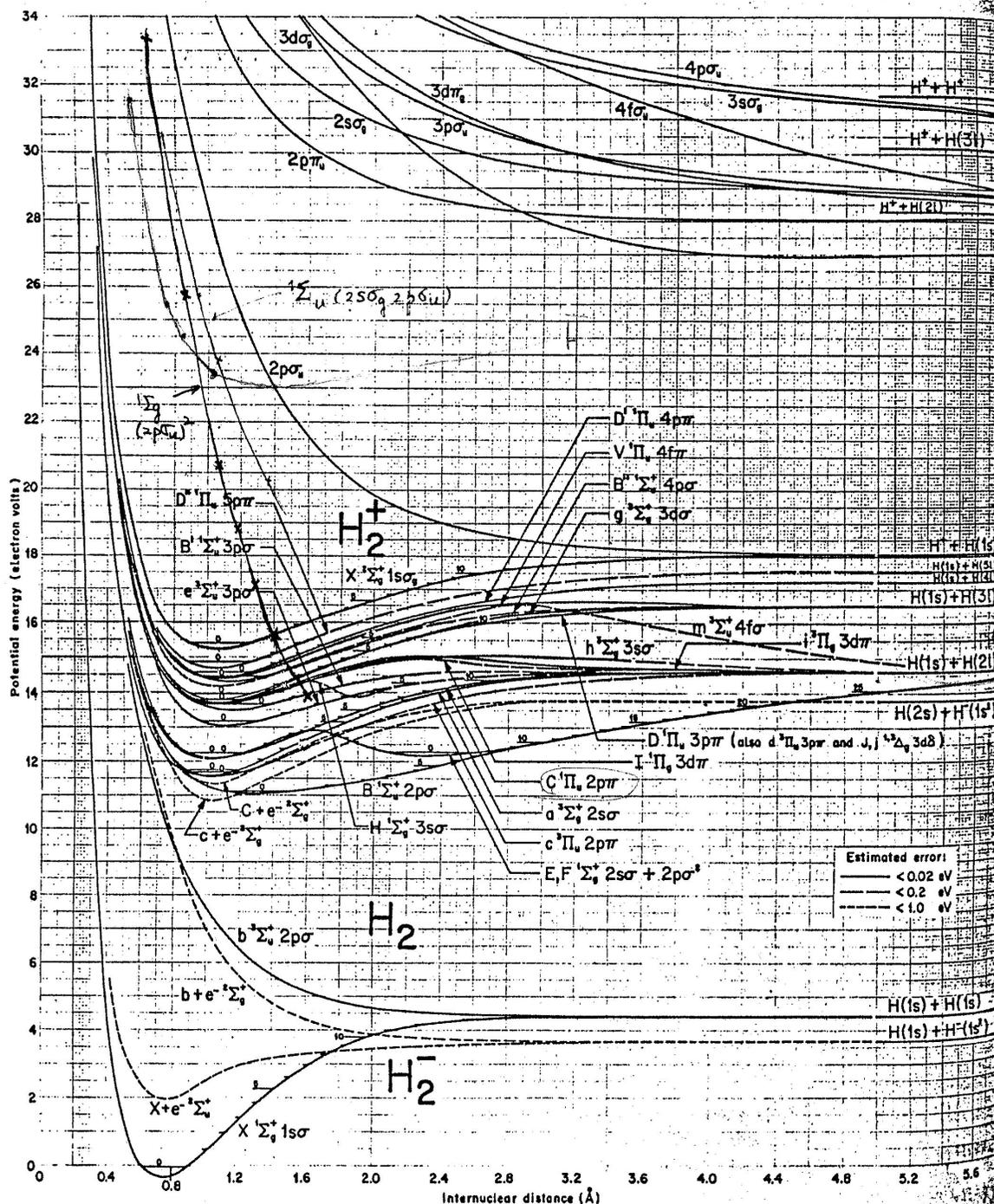


FIG. 2. Potential-Energy Curves for H_2^+ , H_2 , and H_2^-
 A large-scale pullout of this drawing appears at the front of this issue
 In general $1s\sigma$ has been omitted from state designations in order to save space

電子状態 (Sharp)

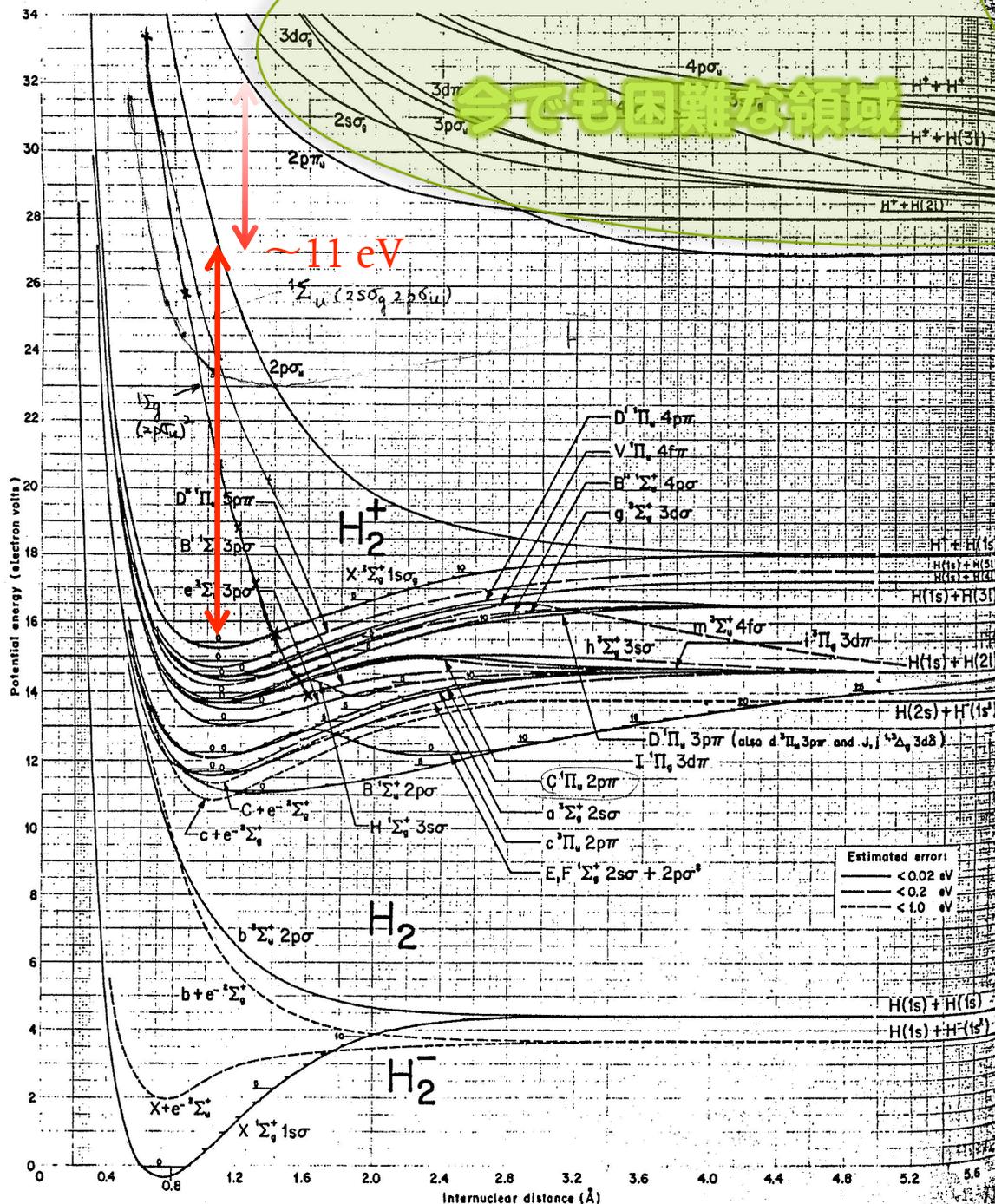


FIG. 2. Potential-Energy Curves for H_2^+ , H_2 , and H_2^-
 A large-scale pullout of this drawing appears at the front of this issue
 In general $1s\sigma$ has been omitted from state designations in order to save space

状態選別断面積の必要性

- ◆ 初期振動状態依存性：解離性再結合，解離性励起
- ◆ 回転状態依存性： 低エネルギーで重要 (<0.3 eV)



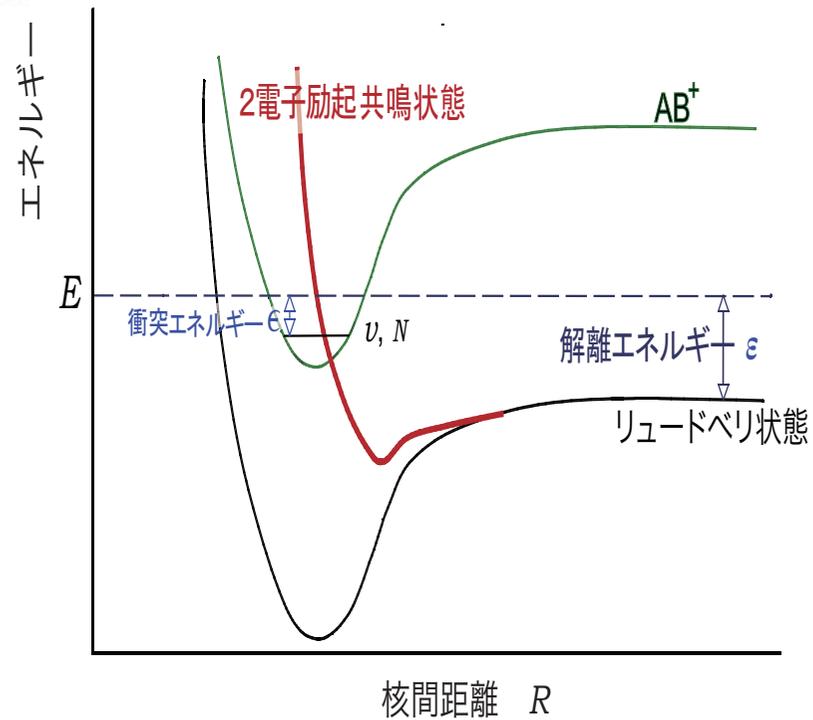
振動回転遷移過程の必要性

状態選別断面積  理論計算

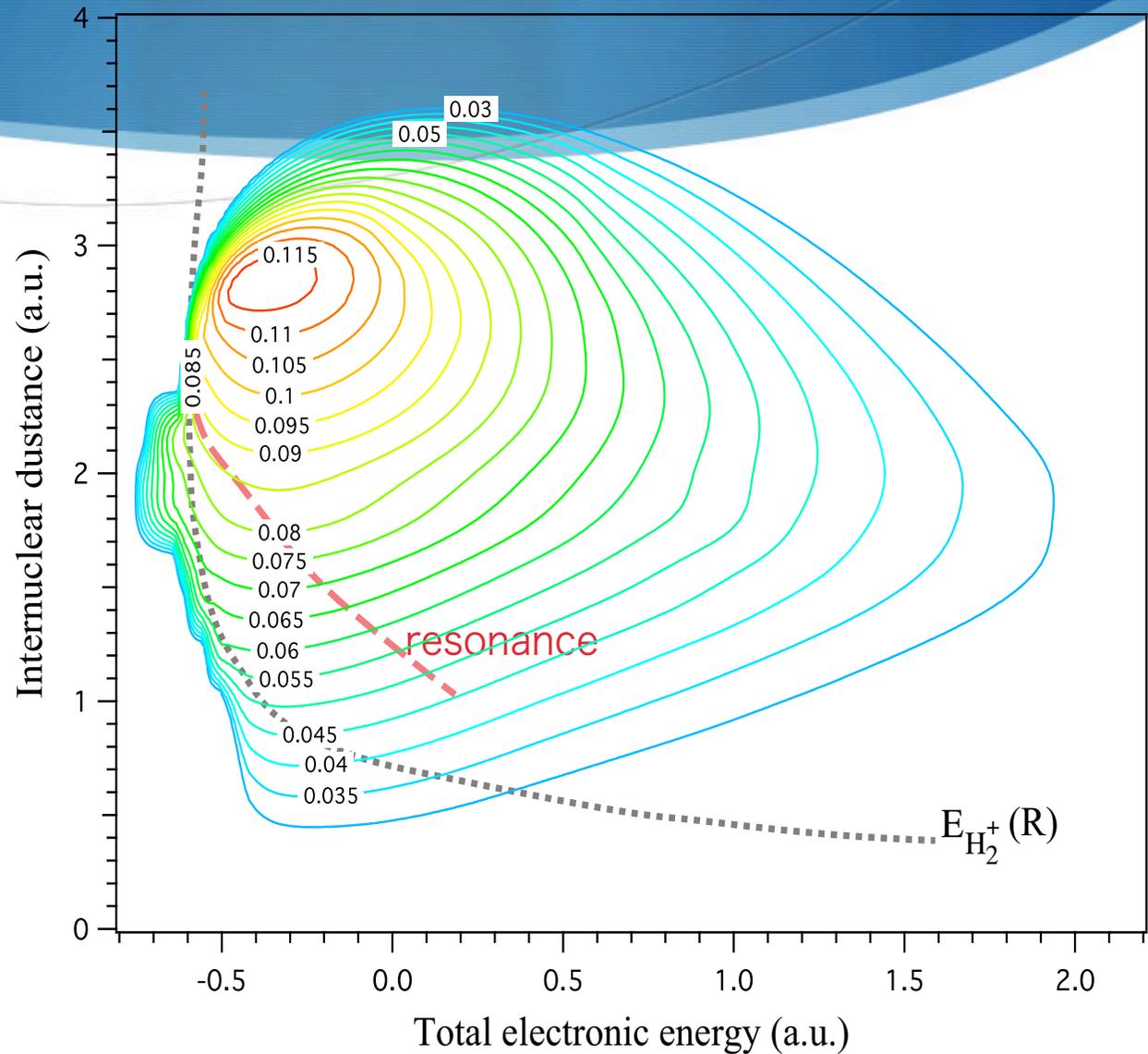
理論計算の方法

配置間相互作用による解離状態への遷移

非断熱相互作用によるRydberg状態への遷移



配置間相互作用の正確な記述

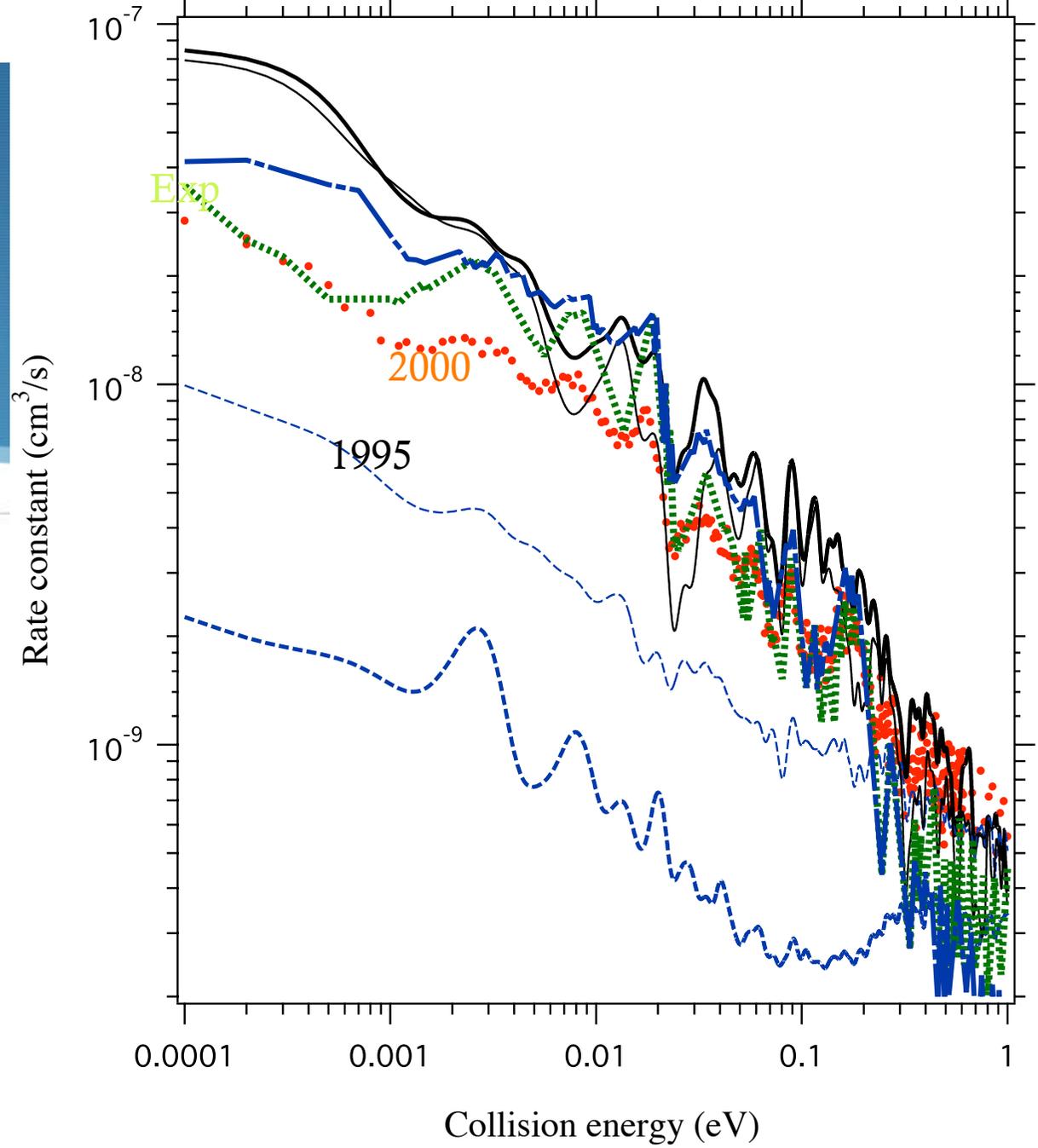


高木, 原, 佐藤 2009

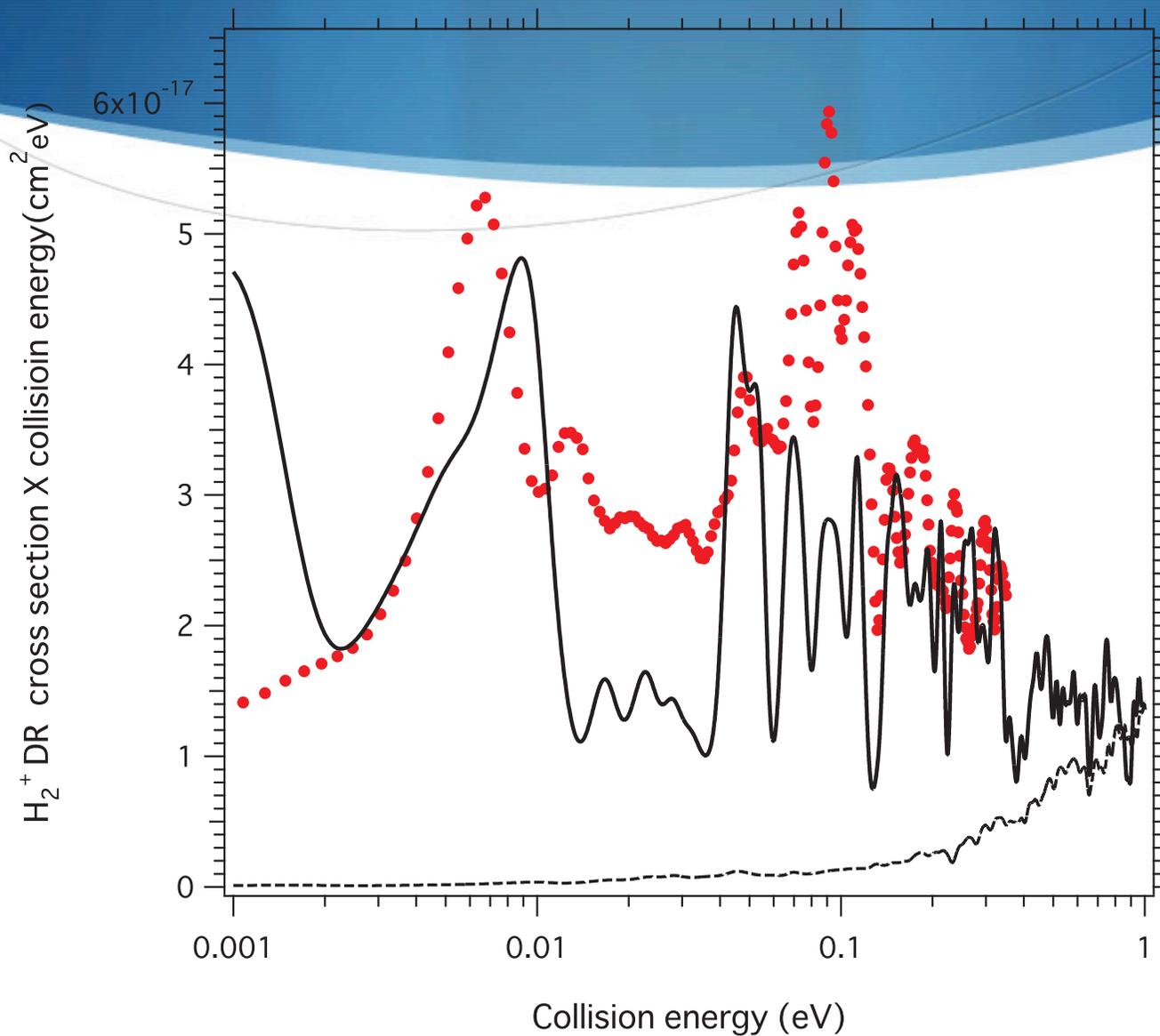
散乱問題の非摂動解法

- Lippmann-Schwinger方程式の代数解法
- Chebyshev求積法の応用
- 負の電子エネルギーからの寄与
(Rydberg状態の寄与)

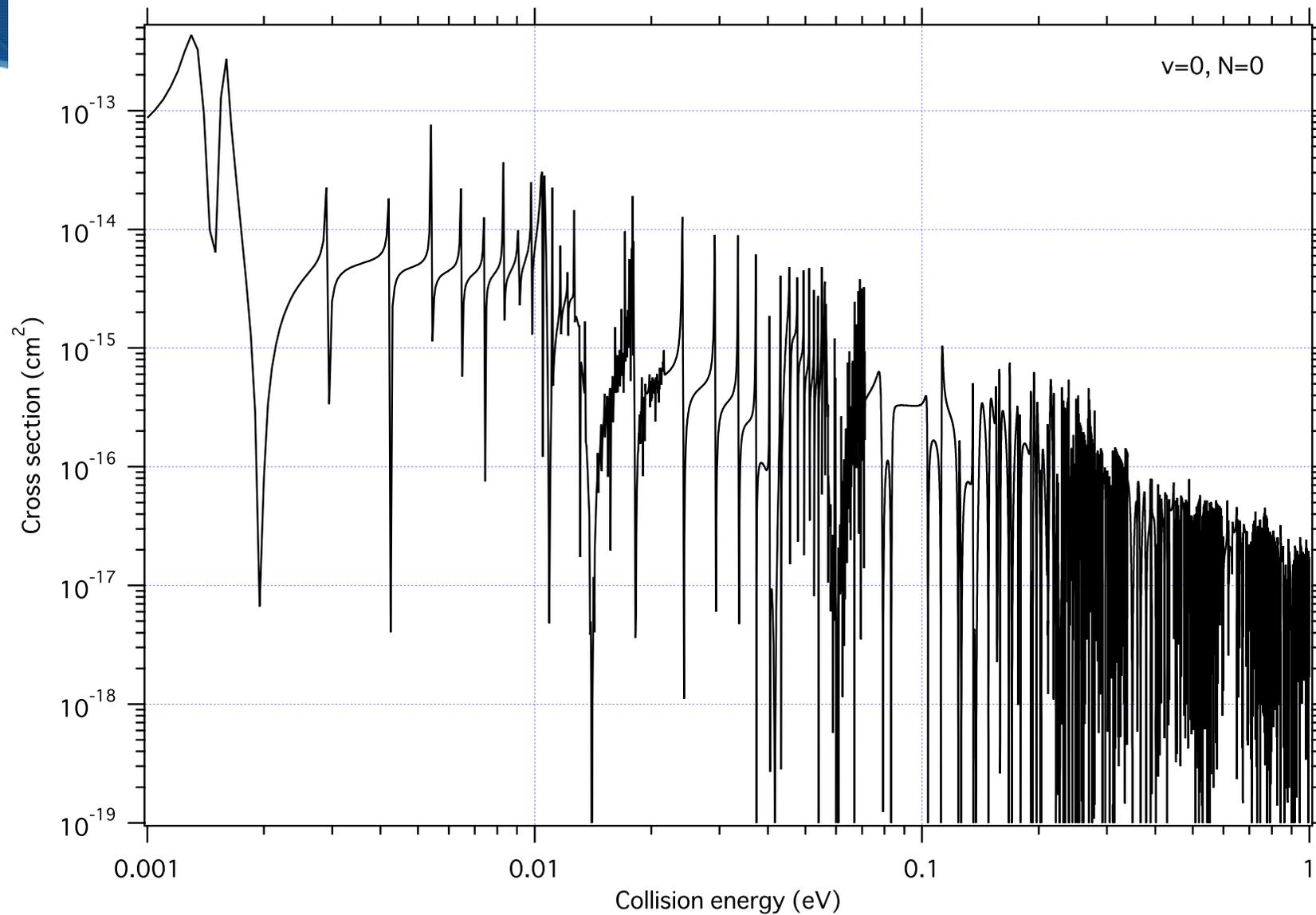
取り扱いによる差(HD)



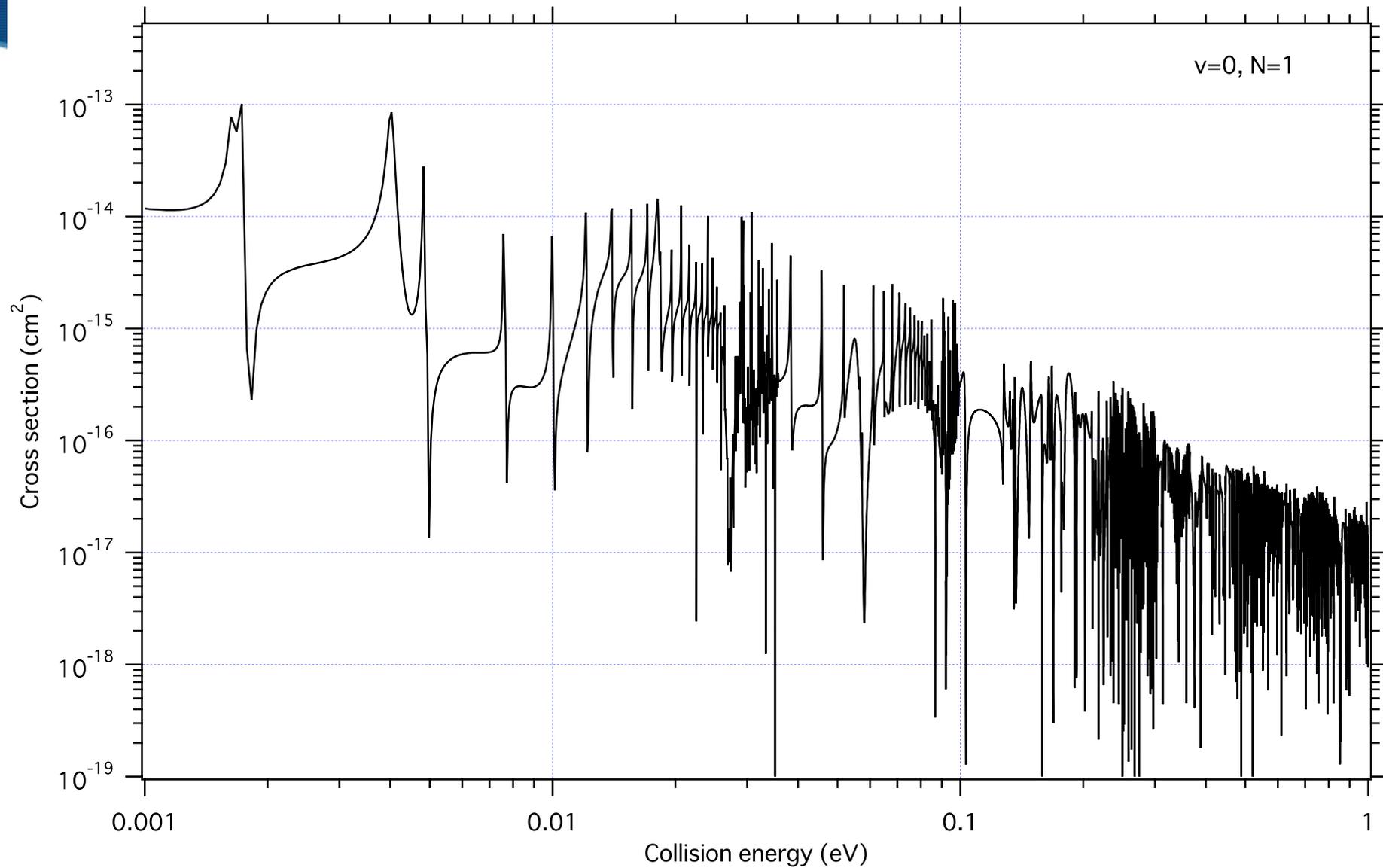
実験との比較 (H₂, Zande et al)



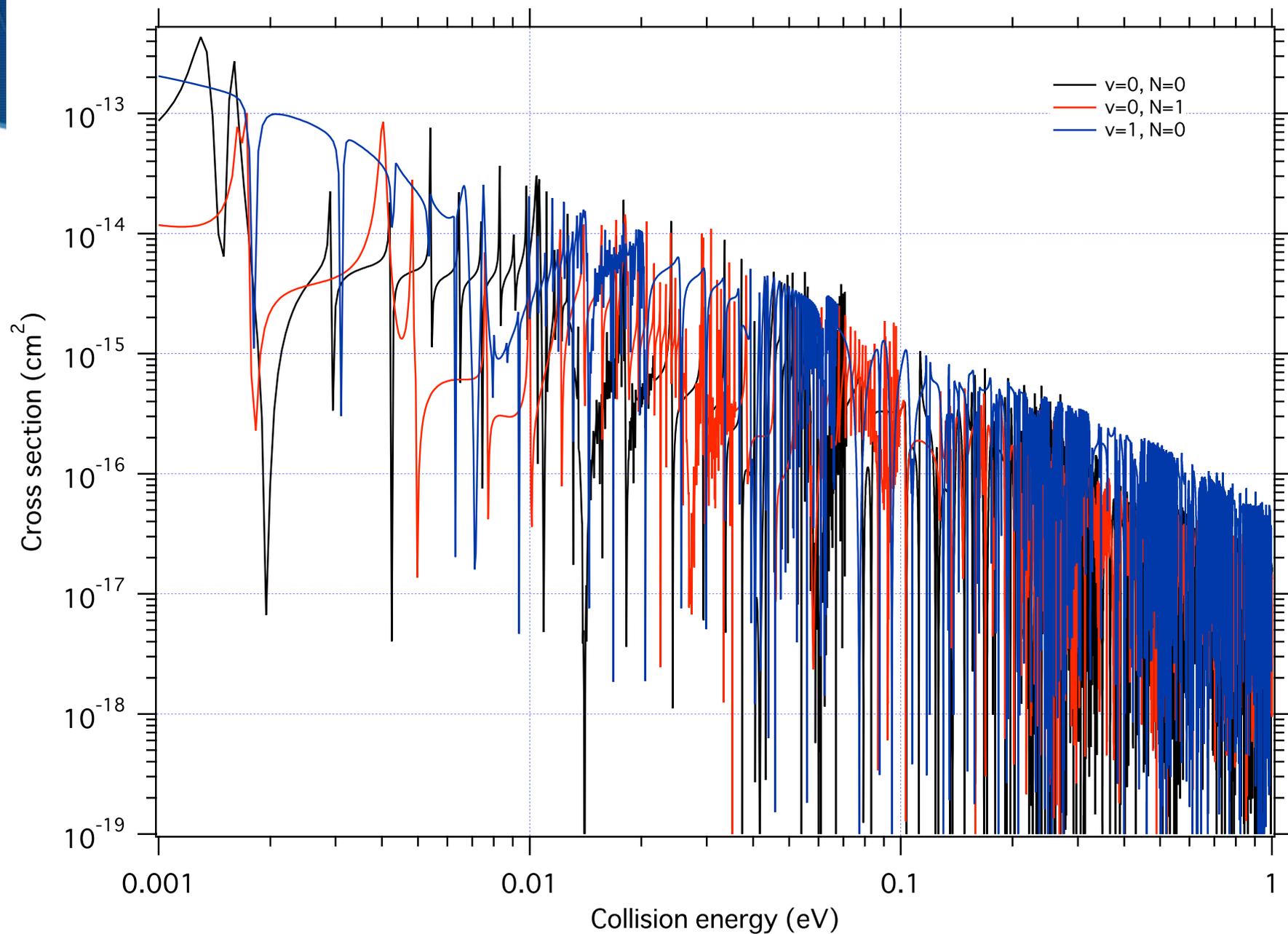
振動回転状態依存DR (1)



振動回転状態依存DR (2)



振動回転状態依存DR (3)



膨大なデータ

解離性再結合

振動状態 0-6 (7)

回転状態 0-10 (11)

組み合わせ: 77 の

エネルギー依存断面積

振動遷移

振動状態 0-16 (17)

組み合わせ: $17C2=272$

エネルギー依存断面積

電子データでの利用 (CDにて供給)

データ形式の統一の問題 : tag word & num. data

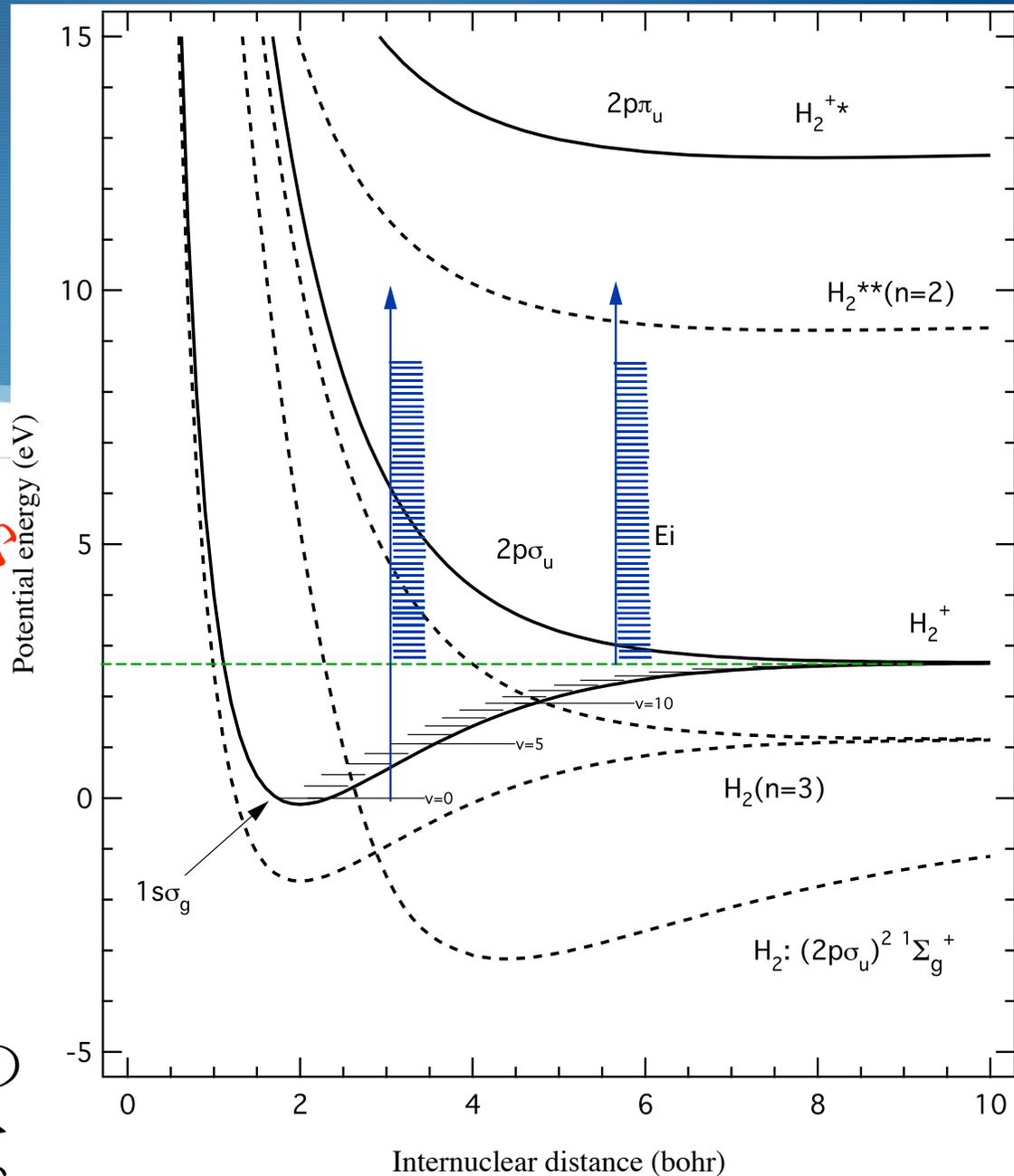
Fig. 1. Potential energy curves of H₂.

2 電子励起 Rydberg状態

解離状態を含む
量子欠損理論

振動状態のように
解離状態を加える

寄与の大きな5つの
Rydberg 系列を考慮



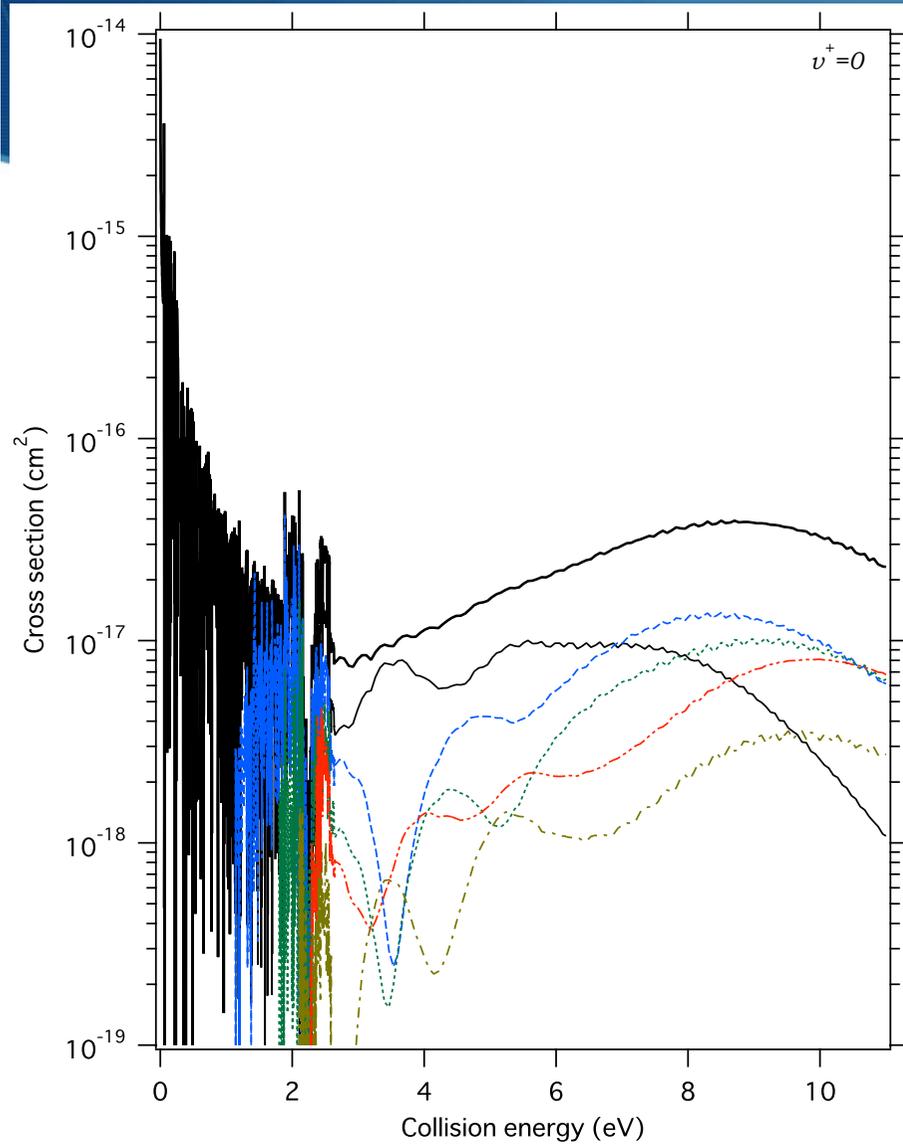
閉じた解離チャンネル CDC

エネルギー保存を満たさない解離状態と
Rydberg状態の組み合わせ

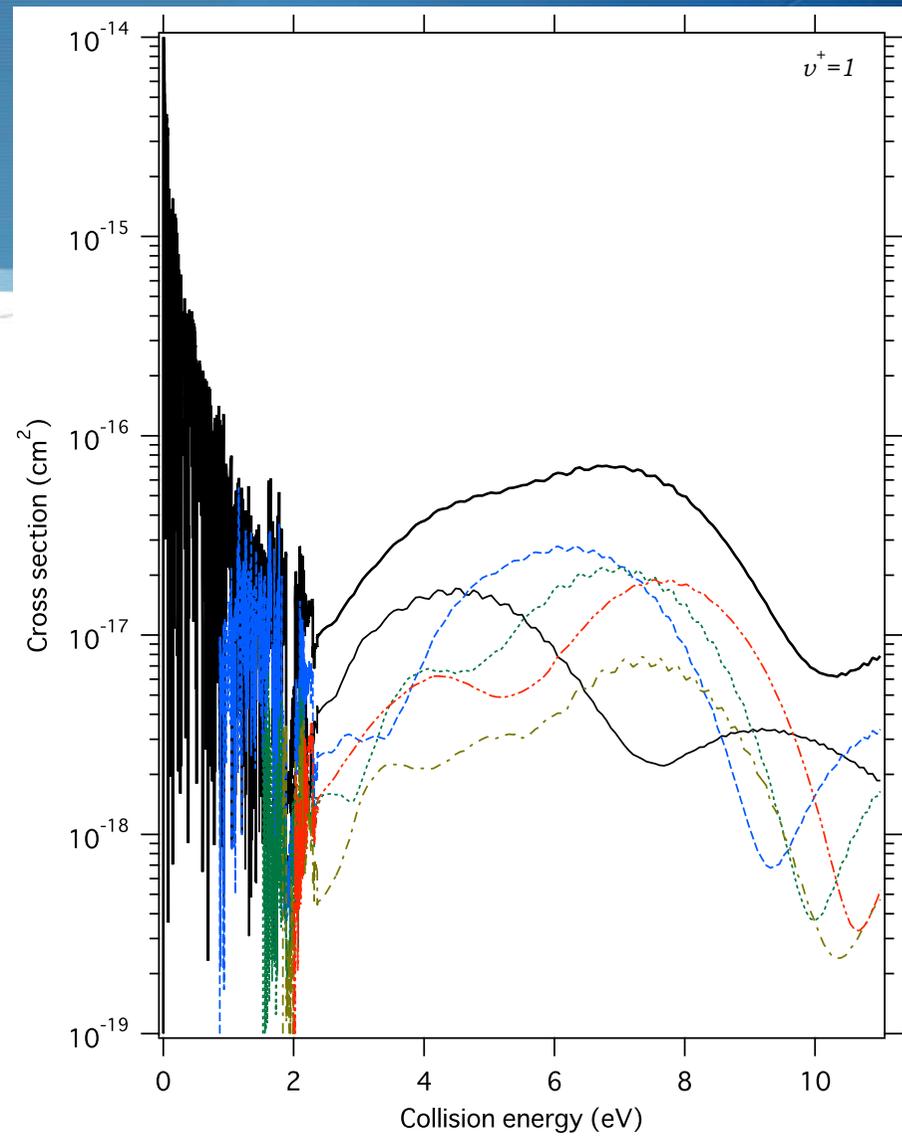


漸近領域で閉じたチャンネルとなる
(量子欠損理論)

振動狀態依存性，解離原子電子狀態

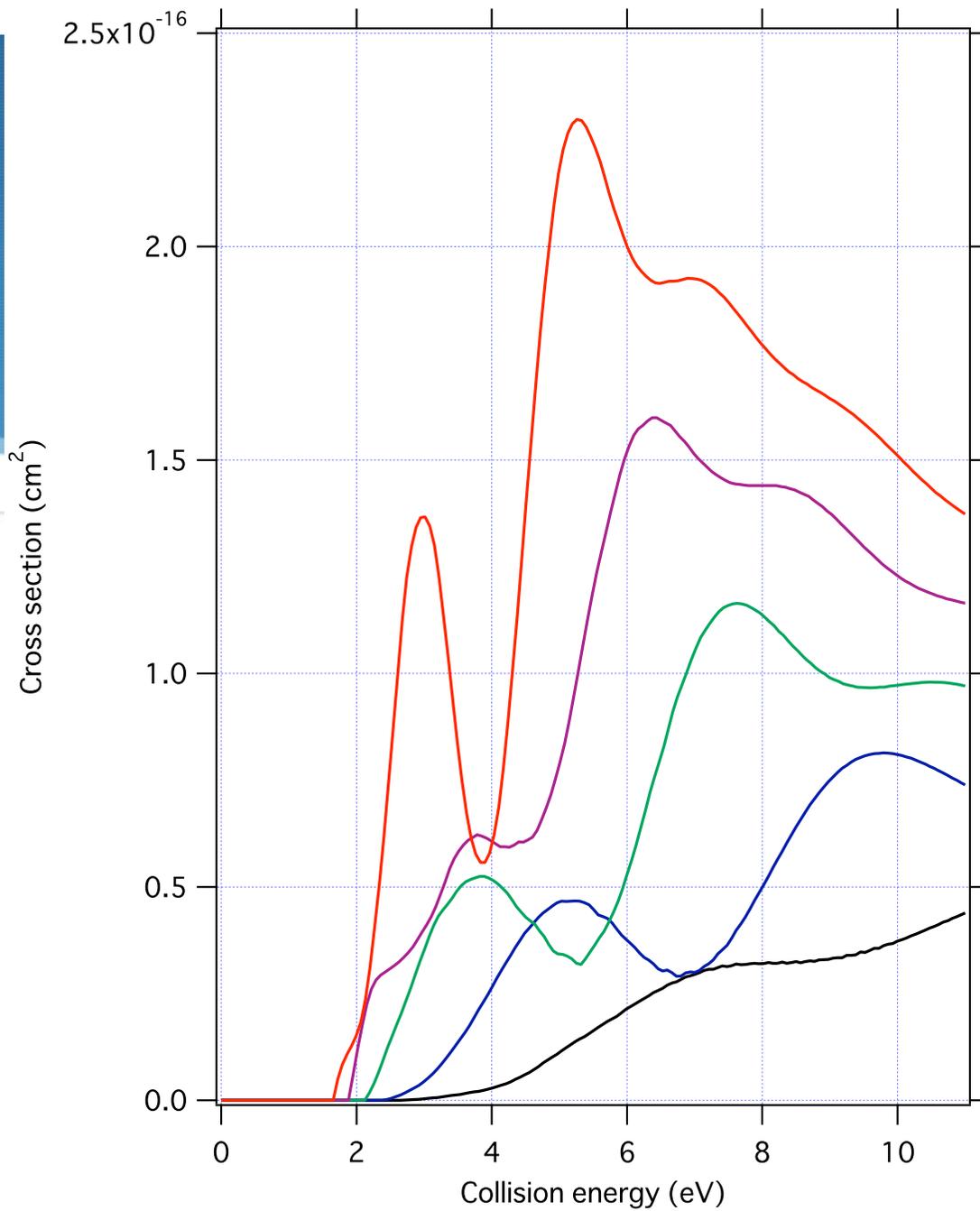


— total
— n2, - - n3, ... n4
- - n5, - - n>=6



— total
— n2, - - n3, ... n4
- - n5, - - n>=6

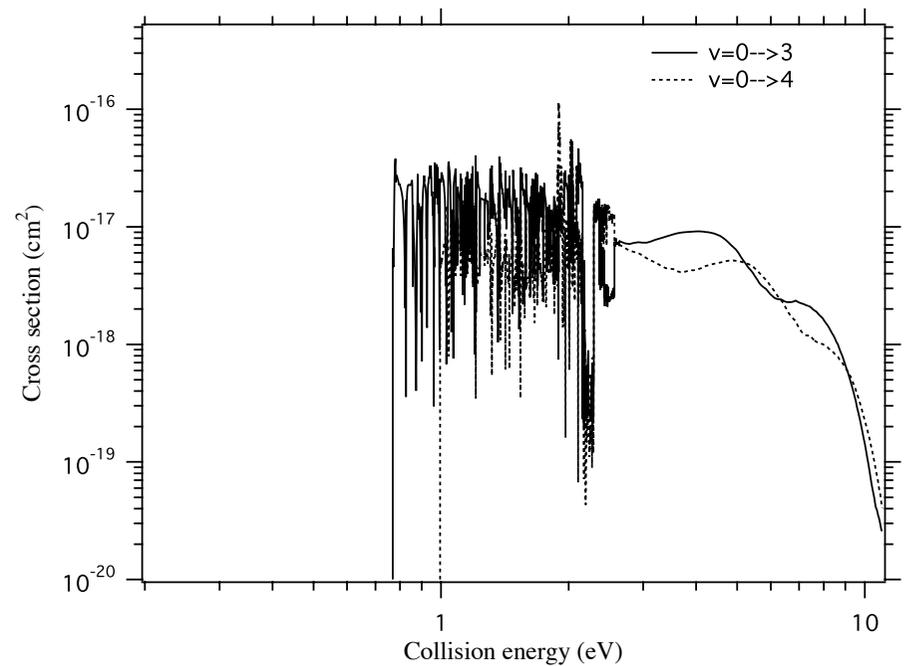
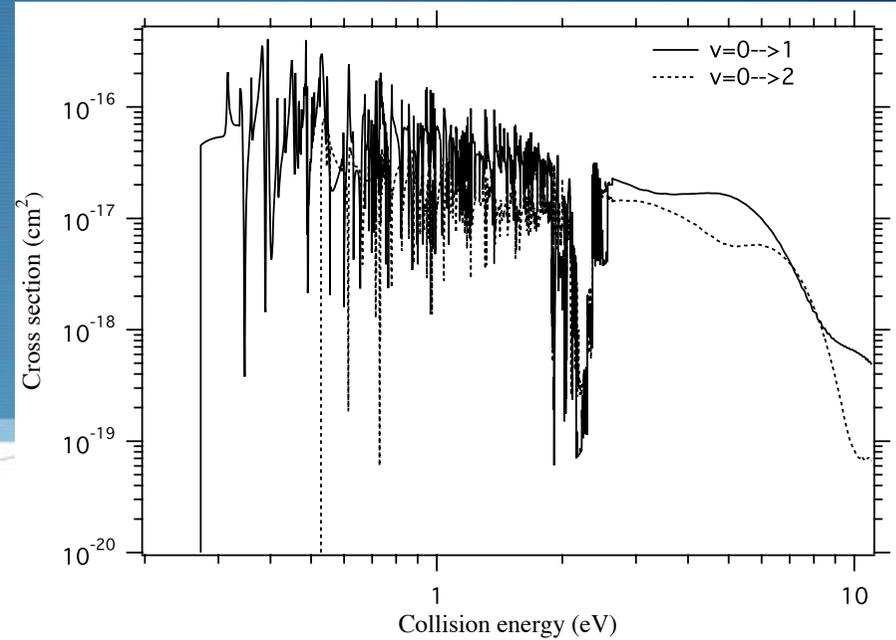
解離性励起



— v=0, — v=1, — v=2
— v=3, — v=4

振動状態遷移

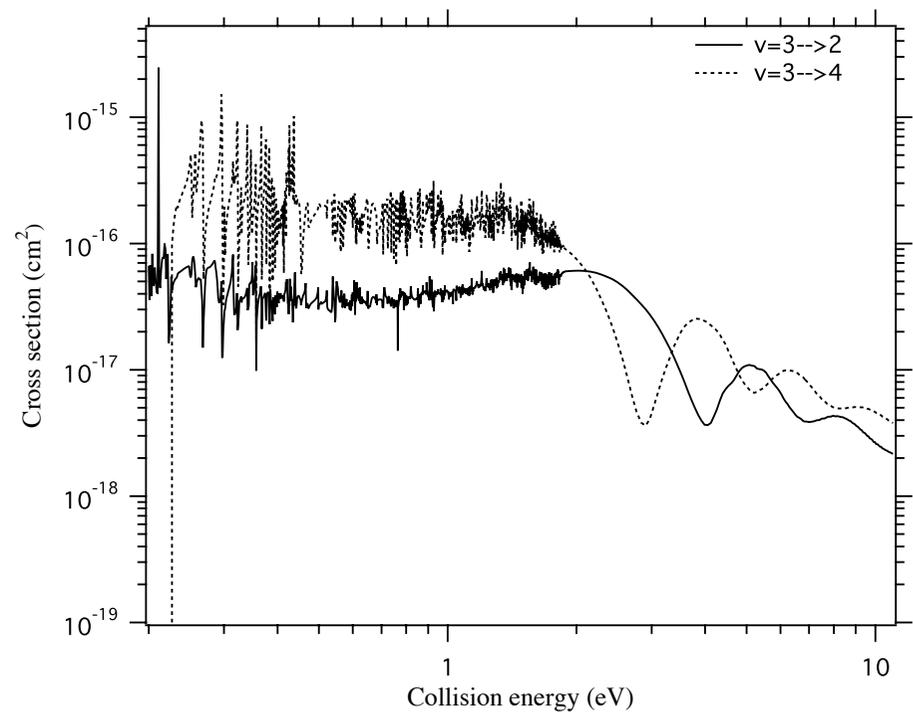
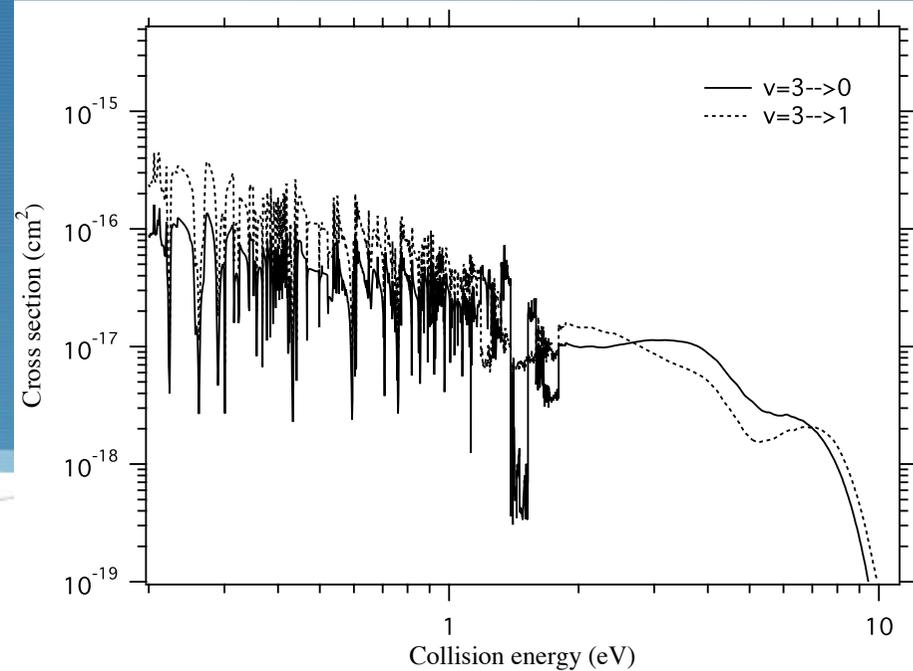
$\Delta v=1$ が最大だが、
大きな状態変化も
無視できない



脱励起 (super elastic)

低エネルギーで
大きな断面積

大きな状態変化



次のデータ

• D_2^+ , T_2^+ , HD^+ , DT^+

• H_3^+